الخلاصة :-

قدمت هذه الرسالة دراسة نظرية لمركبين (كرافاميد و كرافيماين) ثنائية البعد قبل وبعد تشويبهما بذرات العناصر الانتقالية (السكانديوم والتيتانيوم والحديد والنيكل والنحاس والنيوبيوم)، وتم نمذجة الحالة الأساسية وتقديرها باستخدام تقنيات معقدة بما في ذلك حزمة برنامج Gaussian 09 ومستوى B3LYP ومجموعات الأساس 6-31G.

أضيفت ذرات الشوائب إلى مركب الجرافاميد فقط في الحلقة المركزية، بينما تم تشويب مركب الجرافمين بنفس الذرات ولكن في موقعين، أحدهما في الحلقة المركزية والآخر في الأطراف.

تم إجراء الحسابات باستخدام نظرية دالة الكثافة (DFT)(عند الحالة الأرضية) لإيجاد الخصائص الألكترونية وبعض الخصائص الالكتروبصرية. تم حساب قيم الخصائص الإلكترونية للحالة الأرضية للكرافاميد والكرافماين بطريقة نظرية من خلال إشراك المبدأ الأول في حسابات DFT .

وظهر لنا أن قيم طاقات HOMO وLUMO، وفجوة الطاقة، وطاقات مستوى فيرمي، والحالات الإلكترونية، وفجوات الطاقة، وجهد التأين، والألفة الإلكترونية، والسالبية الكهربية، ومبدأ الحامض القوي والضعيف، والقاعدة القوية والضعيفة (HSAB) ، الإلكتروفيليستي، وأقصى طول موجة الانبعاث ، وكثافة الحالة (DOS) كلها تصنف ضمن الخصائص الإلكترونية. وتشمل الخصائص البصرية عزم ثنائي القطب وقابلية الاستقطاب. فيما تشمل الخصائص الهيكلية : الأمثلية الهندسية، والبنية الجزيئية، والأطياف تحت الحمراء(IR) .

ومن أهم الملاحظات التي حصلنا عليها أنه عدم وجود ترددات خيالية لأي نموذج تم استخدامه، مما يبين لنا أن الأمثلية الهندسية للمركبات تقع عند أدنى نقطة لسطح الجهد.

أقل فجوات الطاقة التي تم الحصول عليها هي :

(كرافاميد النحاس 1.084046 eV, كرافيماين السكانديوم 1.684571eV ,كرافيماين النوبيوم 2.430397 eV) وتعد هذه التراكيب الهندسية مفيدة جدًا في التطبيقات الإلكترونية مثل الثنائيات، والترانزستورات، وأجهزة الاستشعار، وكذلك الخلايا الشمسية والمحفزات.